

На правах рукописи

УДК 536.42:536.421.4

АСЕЕВ ДАНИЛ ЛЕОНИДОВИЧ

**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ
В ПРОЦЕССАХ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ РАСПЛАВОВ**

01.04.14 — Теплофизика и теоретическая теплотехника

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Екатеринбург, 2006

Работа выполнена на кафедре математической физики Уральского государственного университета им. А.М. Горького

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
доцент Д.В. Александров.

Официальные оппоненты: доктор технических наук,
профессор, В.М. Кисеев.

доктор физико-математических наук,
профессор П.С. Попель.

Ведущая организация: Институт теплофизики УрО РАН

Защита состоится “__” _____ 2006 года в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.286.01 при Уральском государственном университете им. А.М. Горького по адресу: 620083, Екатеринбург, К-83, пр. Ленина, 51, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Уральского государственного университета им. А.М. Горького.

Автореферат разослан “____” _____ 2006 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Н.В. Кудреватых

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Направленное затвердевание расплавов и растворов представляет значительный интерес в современной науке как с точки зрения прикладной физики кристаллизации, так и с точки зрения развития новых идей и аналитических методов в теоретической теплофизике. Хорошо известны технологические процессы затвердевания, целью которых является получение сверхчистых материалов или материалов с заданным распределением примеси. Существенное влияние на характеристики твердой и жидкой фаз в таких процессах оказывают физические свойства системы и параметры, управляющие затвердеванием. Известны ситуации, когда незначительные изменения условий протекания процесса приводят к формированию совершенно различных структур в обеих фазах. Для этих структур характерно различное распределение примеси, которое может полностью изменить многие свойства получаемых изделий. В силу многопараметричности рассматриваемых систем, с прикладной точки зрения представляется весьма важным разработка аналитических методов моделирования, позволяющих прогнозировать и рассчитывать характеристики возникающих неоднородностей.

Математическое описание процессов кристаллизации основывается на уравнениях тепло- и массопереноса, записываемых во всех существующих фазах, и граничных условиях на поверхностях раздела фаз. Решение проблем подобного типа осложняется присутствием одной или более подвижных границ. Кроме того, подобные задачи содержат нелинейности в граничных условиях, а зачастую, и в самих уравнениях переноса. Поэтому универсальных методов решения таких проблем не существует и в каждом конкретном случае следует подбирать определенный подход к решению. Следует особо подчеркнуть, что численное решение, основывающееся на фиксации большинства параметров системы, не во всех ситуациях может выполнять прогнозирующую роль. Как следствие, возникает необходимость получения точных и приближенных аналитических решений, показывающих и выявляющих доминантную роль тех или иных параметров системы.

Цель работы. Аналитическое описание и исследование нелинейной динамики кристаллизационных процессов с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения в условиях различных форм тепломассопереноса. В рамках поставленной цели исследовались отдельные модели направленного затвердевания с двухфазной зоной, обобщающие классические постановки задачи. В частности изучалось:

- Влияние нелинейных эффектов массопереноса на эволюцию двухфазной зоны. Роль эффекта Соре и температурной зависимости коэффициента

диффузии в процессах кристаллизации бинарных расплавов. Изучение условий, при которых нелинейные эффекты усиливают или уменьшают интенсивность массообмена в двухфазной зоне.

- Затвердевание с двухфазной зоной при конвективном движении жидкой фазы в системе. Влияние одномерных конвективных потоков на характеристики процесса. Рамки применимости квазистационарного приближения для описания слабых скоростей движения расплава и условия разрушения полученных решений в зависимости от силы конвективного потока.
- Строение и структура неравновесной двухфазной зоны. Процессы объемного затвердевания в переохлажденном расплаве, рост твердых частиц и их распределение в пространстве перед растущим кристаллом. Особенности кристаллизации с неравновесной двухфазной зоной, определение величины концентрационного переохлаждения.

Научная новизна диссертации заключается в постановке и изучении новых моделей направленного затвердевания с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения, в той или иной степени расширяющих ранее известные постановки задачи и учитывающих влияние различных нелинейных физических процессов, протекающих в системе. В общей сложности были исследованы три новые модели для каждой из которых построены аналитические решения. Найденные решения определяют все характеристики процесса кристаллизации с переохлажденной областью. В частности, найдены температурные и концентрационные профили, скорости процесса, ширина двухфазной зоны, доля твердых кристаллов в ней. Помимо этого были получены следующие оригинальные результаты:

- Изучено влияние эффекта Сор на кристаллизацию с квазиравновесной двухфазной зоной. Выяснено, что в зависимости от значения коэффициента термодиффузии, эффект может как усиливать массообмен, так и уменьшать его. Обнаружено, что температурная зависимость коэффициента диффузии по разному влияет на развитие двухфазной зоны в зависимости от управляющих параметров процесса. Обнаружено и подтверждено расчетами самоподобное поведение концентрации примеси и доли твердой фазы в двухфазной зоне при изменении температурных градиентов. Определены скачки теплофизических величин при переходе через переохлажденную область, а также сформулирована фронтальная модель затвердевания с двухфазной зоной.
- Определены распределения температуры и концентрации примеси при

различных скоростях одномерного конвективного потока, натекающего на кристалл. Выявлено влияние слабой конвекции на характеристики двухфазной зоны. Обнаружено, что при усилении скорости течения жидкой фазы, температурный и концентрационный профиль в расплаве имеют тенденцию к сглаживанию. Определены рамки применимости построенных аналитических решений в зависимости от силы конвективного потока, сделан вывод о неустойчивости квазистационарного режима затвердевания с неподвижной жидкой фазой по отношению к малым скоростям движения расплава.

- Исследован режим кристаллизации с неравновесной двухфазной зоной. Найдено распределение твердых частиц в зоне в зависимости от их размеров. Исследована макроструктура переохлажденной области, выделено три региона с различным поведением концентрационного переохлаждения в них. Наличие и расположение этих регионов вполне согласуется с известными ранее экспериментальными данными. Определена роль квазиравновесной теории двухфазной зоны в более общей неравновесной постановке задачи.

Достоверность полученных результатов обеспечивается адекватностью физических представлений и моделей теории кристаллизации в больших объемах, используемых для исследований процессов тепло- и массопереноса. Кроме того – соответствием полученных теоретических результатов данным экспериментов, а также строгостью математических вычислений и согласованностью их результатов.

Практическое значение. Полученные в диссертации результаты о структуре и свойствах переохлажденной двухфазной зоны могут быть полезны в геофизике (замерзание морской воды, образование гранитов и базальтов в разломах земной коры) и металлургии (получение материалов с заданными свойствами).

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на представительных научных конференциях: 11-я Российская конференция “Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов”, МиШР-11 (Екатеринбург, 2004); 14-й Международный семинар по вычислительной механике материалов, IWСММ-14 (Гоа, Индия, 2004); 11-я Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-11 (Екатеринбург, 2005); 14-я Всероссийская школа-конференция молодых ученых “Математическое моделирование в естественных науках”, ММЕН-2005 (Пермь, 2005); 3-я научно-техническая конференция “Физические свойства металлов и сплавов”, ФСМиС-2005 (Екатеринбург, 2005); Первый Российский научный форум Демидовские чтения на Урале (Екатеринбург, 2006);

10-я Российская научно-студенческая конференция “Физика твердого тела” (Томск, 2006), а также на научных семинарах в Институте Металлургии УрО РАН, Институте теплофизики УрО РАН и на кафедре математической физики УрГУ.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 15 научных работ, из них 5 статей в реферируемых научных журналах, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав основного содержания, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 131 страницу машинописного текста, она содержит 31 рисунок, 2 таблицы и 114 ссылок на литературные источники.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко обоснованы актуальность работы, сформулированы ее цели, указаны научная новизна, практическое значение и апробация проведенных исследований.

Глава 1. Современные достижения теории направленного затвердевания

Первая глава носит обзорный характер и является ретроспективной наиболее значимых с точки зрения настоящего изложения результатов. В ней изложено введение в проблему направленного затвердевания, приведены основные сведения об особенностях протекания процессов тепло- и массопереноса, обсуждены известные математические модели и экспериментальные данные.

Глава 2. Влияние эффекта Соре и температурной зависимости коэффициента диффузии на эволюцию квазиравновесной двухфазной зоны

Во второй главе изучается процесс направленного затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной концентрационного переохлаждения в условиях нелинейного массопереноса (термодиффузии и температурной зависимости коэффициента диффузии).

Процессы переноса тепла и массы в двухфазной зоне описываются следующими уравнениями [1]:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho C \theta) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + L_V \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \quad \frac{\partial}{\partial \tau}((1 - \varphi)\sigma) = -\frac{\partial}{\partial \xi} J - k \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \quad (1)$$

где σ и θ – значения концентрационного и температурного полей, φ – доля твердой фазы в двухфазной зоне, ρ , C , λ , L_V , k – плотность, теплоемкость,

теплопроводность, коэффициенты выделения скрытой теплоты затвердевания и распределения примеси на фронте, J – поток массы. Из условия квазиравновесности двухфазной зоны следует, что температура в ней равна температуре фазового перехода: $\theta = \theta_p^0 - m\sigma$ (m – наклона линии ликвидус). Следует подчеркнуть, что коэффициенты ρ , C и λ зависят от доли твердой и жидкой фаз в зоне. На границах двухфазной области с кристаллом и расплавом выполняются условия баланса температурного и концентрационного полей (см., например, [1, 2]). Известно, что поток вещества может быть представлен в следующей форме [3]:

$$\mathbf{J} = -D\nabla\sigma - D_T(\beta_0 + \beta_1\sigma)\nabla\theta. \quad (2)$$

Первое слагаемое в выражении (2) отвечает за обычную диффузию вещества, а второе – за термодиффузию (D_T – коэффициент термодиффузии, β_0 и β_1 – константы). Кроме того, коэффициент диффузии D , вообще говоря, зависит от температуры. Будем рассматривать линейную зависимость $D(\theta) = D_p + (\partial D/\partial\theta)(\theta - \theta_p^0)$ (D_p – значение коэффициента диффузии при температуре плавления θ_p^0 , $\partial D/\partial\theta$ – температурный коэффициент). Исследование модели (1),(2) было проведено для установившегося процесса затвердевания с постоянной скоростью движения фазовых границ V [2, 4]. Методом перехода к новой переменной φ (см., например, [4]), удалось свести систему уравнений к единственному дифференциальному уравнению, которое было решено численно. На рис. 1 изображены найденные концентрационные профили по твердой фазе двухфазной зоны и приведено их сравнение с экспериментальными данными.

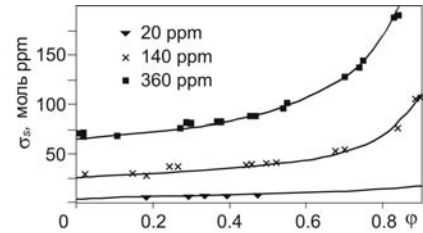


Рис. 1: Сравнение теоретических решений модели (1),(2) с экспериментами работы [5] (кривые и точки, соответственно) для различных значений начальной концентрации примеси.

Обычно время релаксации температурного поля значительно меньше времени релаксации концентрационного, поэтому можно пренебречь левой частью первого уравнения (1). Для этого случая в диссертации построено точное аналитическое решение. Найденны функциональные зависимости всех неизвестных величин. Рис. 2 показывает зависимость толщины H двухфазной зоны от температурного градиента g_s в кристалле, при различных значениях градиента g_ℓ в расплаве. Из рисунка видно, что толщина зоны в классическом случае меньше, чем в рассматриваемом, при некоторых, относительно малых, значениях g_s . Увеличение же значения температурного градиента в кристалле изменяет это соотношение. Видимо последнее происходит благодаря следующим процессам. Очевидно, что при увеличении

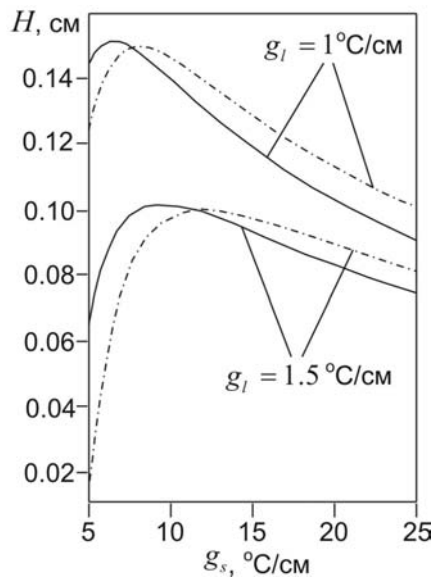


Рис. 2: Толщина двухфазной зоны H , как функция температурных градиентов g_s и g_l для системы Fe-Ni. Сплошные линии – общий случай (поток массы задается соотношением (2)), штрихпунктирные линии – классический случай.

пересечения сплошных и штрихпунктирных линий). Кроме этого, было выяснено, что действие эффекта Соре зависит от знака коэффициента термодиффузии. В случае отрицательного значения этого коэффициента, термодиффузионный поток вещества направлен также, как и обычный диффузионный поток и усиливает его (при этом, концентрационное переохлаждение перед растущим кристаллом, а значит и доля твердой фазы, уменьшается). В противном случае, потоки направлены в противоположные стороны и термодиффузия стремится погасить диффузионный перенос вещества (переохлаждение и доля твердой фазы перед фронтом увеличиваются).

Помимо этого, на основе полученных решений удалось подтвердить гипотезу о самоподобном строении переохлажденной области [4], а также вывести новую модель затвердевания с двухфазной зоной, в которой последняя заменена поверхностью разрыва [2].

Глава 3. Затвердевание с квазиравновесной двухфазной зоной в условиях конвекции расплава

Особый интерес представляют процессы затвердевания в условиях конвективного движения расплава, так как конвекция практически всегда присутствует в реальных системах. Для учета этого явления, в левые части уравне-

$\partial D / \partial \theta$, отвод примеси от границы растущего кристалла вглубь двухфазной области и в расплав уменьшается (см. уравнение (2)). Следовательно, концентрация примеси в классическом случае меньше, чем в рассматриваемом на границе зоны с кристаллом и больше на границе зоны с расплавом. Последнее увеличивает концентрационное переохлаждение вблизи границы двухфазная зона – расплав, что ведет к росту толщины самой зоны (см. области на рис. 2, находящиеся правее точек пересечения сплошных и штрихпунктирных линий). Однако, примесь, переносимая от фронта затвердевания при малых значениях g_s , слабо охлаждена. В этом случае толщина зоны определяется в первую очередь концентрационным переохлаждением вблизи границы с кристаллом. Так как концентрация примеси в нашем случае больше, чем в классическом случае, то и толщина зоны также больше (см. области на рис. 2, находящиеся левее точек

ний тепломассопереноса (1) необходимо добавить члены вида $\mathbf{U} \cdot \nabla \theta$ и $\mathbf{U} \cdot \nabla \sigma$, где \mathbf{U} – скорость течения жидкой фазы. В силу сложности такой модели, мы ограничимся рассмотрением только одномерного случая: жидкость натекает на растущий кристалл с постоянной скоростью и целиком вмораживается в него. Подобный режим может иметь место на начальных стадиях возникновения конвекции или когда неподвижный расплав испытывает малые колебания, возникающие из-за внешних факторов. Модифицировав метод решения, предложенный в работе [4] (а также во второй главе), удалось получить аналитическое решение квазистационарной конвективной задачи и выразить все искомые величины через термофизические константы процесса.

Полученные решения показали, что скорость затвердевания, доля твердой фазы (см. рис. 3) и протяженность двухфазной зоны (на рис. 3 – точки, в которых φ обращается в нуль) увеличиваются при усилении конвективного потока (т.е. при увеличении скорости натекания расплава на растущий кристалл). В тоже время, концентрационный и температурный профили имеют тенденцию к сглаживанию при усилении конвекции, что иллюстрирует основное свойство свободной конвекции, хорошо известное из экспериментов, – выравнивание температуры и концентрации примеси в объеме. Кроме того, было показано, что при увеличении скорости жидкой фазы и достижении ей некоторого критического значения, полученные решения разрушаются. Это позволяет говорить о том, что квазистационарный режим неустойчив по отношению к слабой конвекции расплава.

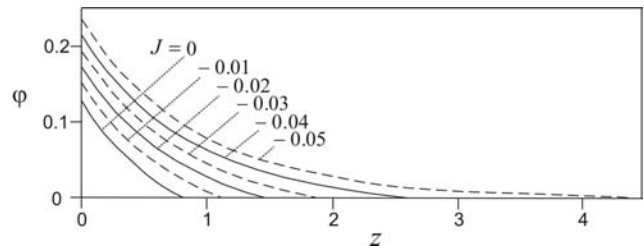


Рис. 3: Профили доли твердой фазы $\varphi(z)$ (z – безразмерная координата) в двухфазной зоне при различных относительных скоростях конвекции $J = U/V$.

Глава 4. Нелинейная динамика затвердевания с неравновесной двухфазной зоной

Вторая и третья главы диссертации посвящены квазиравновесной двухфазной области, температура в которой равна температуре фазового перехода (ликвидуса). Однако, очевидно, что такой подход является идеализированным и для более полного понимания процессов, происходящих в переохлажденной области, необходимо рассматривать неравновесную двухфазную зону, в которой переохлаждение $\Delta\theta > 0$. Построению такой теории посвящена четвертая глава диссертации.

Для вычисления функции φ необходимо описать механизмы нуклеации

и роста элементов твердой фазы в двухфазной зоне. Для этого были использованы следующие модельные предположения (см. также [2]): кристаллы имеют сферическую форму и радиус критических частиц (способных к дальнейшему росту) равен нулю, скорость нуклеации (зарождения кристаллитов) определяется формулой из теории Френкеля-Зельдовича (см., например, [6]): $I = I_* \exp(-p/\Delta\theta^2)$ (I_* – предэкспоненциальный фактор, p – размерное число Гиббса), рост радиуса r кристаллика находится из теории о снятии переохлаждения в однокомпонентном расплаве [2]: $dr/dt = \beta_* \Delta\theta / (1 + \beta_*(L_V/\lambda_\ell)r)$ (β_* – кинетический коэффициент), эволюция кристаллов в двухфазной области описывается функцией плотности распределения частиц по размерам $f(t, z, r)$, удовлетворяющей кинетическому уравнению $\partial f/\partial t + \partial(dr/dt \cdot f)/\partial r = 0$. В этом случае, доля твердых частиц в двухфазной зоне выразится следующим образом:

$$\varphi = \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} r^3 f(z, r) dr. \quad (3)$$

В совокупности с соотношениями, определяющими тепломассоперенос, общая модель, описывающая процесс представляет собой сложную систему взаимосвязанных нелинейных интегро-дифференциальных уравнений с двумя неизвестными границами кристалла и расплава с двухфазной зоной. Следует отметить, что предложенная модель адекватно описывает лишь переохлажденную область с небольшой долей φ твердых частиц, так как используемые здесь кинетические уравнения не учитывают рост кристаллов в результате их взаимодействия. Это означает, что твердая фаза в двухфазной зоне должна быть достаточно “разрежена”.

В предположении о высокой энергии активации процесса зародышеобразования ($p \gg \Delta\theta^2$), интеграл в уравнении (3) можно приближенно вычислить методом перевала. Кроме того, были применены следующие упрощающие предположения: время релаксации температурного поля много меньше, чем время релаксации концентрационного и примесь в жидкой фазе распределена по закону Шейла [7]. Тогда, вводя сложные замены переменных, представленную систему можно свести к обыкновенному дифференциальному уравнению с известными границами, которое легко решается численными методами. Таким образом, впервые было получено решение задачи о направленном затвердевании с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения, учитывающей рост кристаллов. Полученные результаты позволили исследовать поведение основных параметров переохлажденной области. На рис. 4 построена зависимость переохлаждения от координаты z и приведены экспериментальные данные. Видно, что качественно теоретическая и экспериментальная

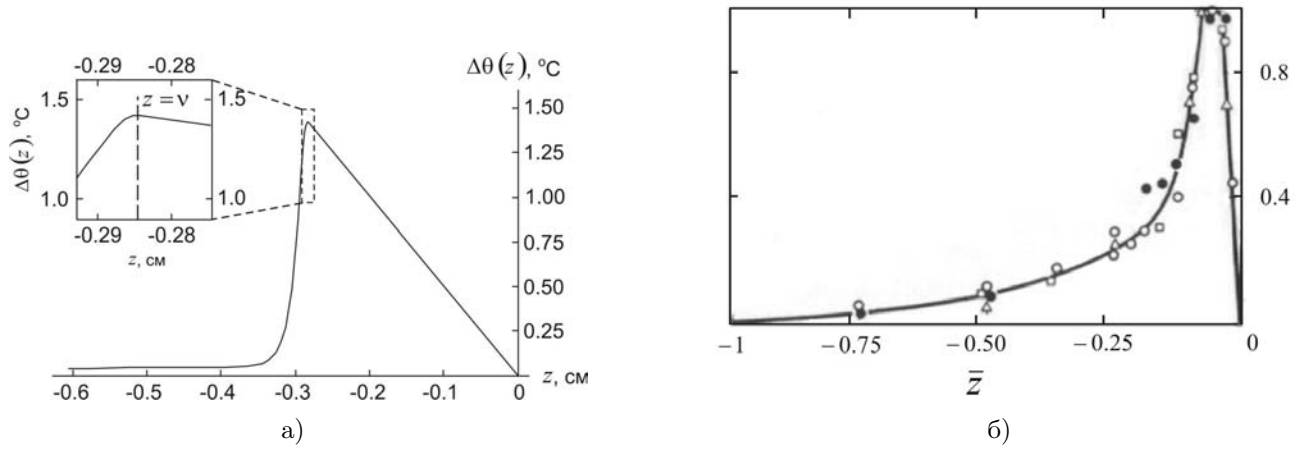


Рис. 4: Переохлаждение в двухфазной зоне: а - теоретическая кривая, согласно развиваемой теории, б - экспериментальные данные и кривая В.Т. Борисова, построенная по экспериментальным данным [1] (\bar{z} – специальным образом обезразмеренная пространственная координата, по оси ординат отложено относительное переохлаждение)

кривые имеют одинаковую характерную структуру (о количественном согласии говорить не приходится, так как экспериментальные условия не соответствовали модельным). Это позволяет сделать вывод о том, что развитая в диссертации теория вполне адекватно описывает процесс затвердевания, по крайней мере на качественном уровне. Можно выделить три основных участка в двухфазной зоне с различным поведением переохлаждения (см. рис. 5). Участок 1 ($\nu \leq z \leq 0$): весьма быстрое линейное возрастание с убыванием z от границы с расплавом ($z = 0$) до достижения максимума ($z = \nu$), в этой области рост кристаллов практически не происходит ($\varphi \approx 0$). Участок 2 ($z_{eq} \leq z \leq \nu$, $z_{eq} \approx -0.4$ см.): увеличение $\Delta\theta$ на предыдущем участке приводит к интенсивному росту твердых кристаллов, которые выделяют скрытую теплоту кристаллизации, снимающую переохлаждение. Участок 3 ($-h \leq z \leq z_{eq}$, h – ширина зоны): концентрационное переохлаждение почти снято ($\Delta\theta \approx 0$).



Рис. 5: Структура неравновесной двухфазной зоны.

На участке 3 доля твердой фазы достигает относительно больших величин по сравнению с жидкой. Как было отмечено ранее, в этом случае используемая модель не в состоянии адекватно описать процесс. Для устранения этого недостатка следовало бы использовать более сложную кинетическую теорию, учитывающую взаимодействие растущих кристаллов между собой. Однако, можно пойти более простым путем. В силу того, что $\Delta\theta \approx 0$, в этой области можно использовать квазиравновесное приближение. Таким образом, область двухфазной зоны, прилегающую к кристаллу, можно считать квазиравновес-

ной (температура равна температуре ликвидуса). Однако, в некотором слое перед кристаллом ($z_{\text{eq}} < z < 0$) переохлаждение нельзя считать близким к нулю, этот слой следует описывать неравновесной теорией.

Помимо величины переохлаждения, в работе найдены соотношения для остальных характеристик двухфазной области, в том числе доли твердой фазы и функции плотности распределения f , что позволяет определить количество и размеры кристаллов в различных участках зоны.

Заключение

В результате тщательного аналитического рассмотрения различных моделей направленного затвердевания бинарного расплава с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения, учитывающих те или иные особенности процесса, были получены следующие основные результаты:

- Построена математическая модель, учитывающая влияние нелинейных факторов массопереноса: эффект Соре (термодиффузия) и температурная зависимость коэффициента диффузии в процессах массообмена, протекающих в жидкой фазе. Описанная модель была решена численно в общем случае. Построено ее аналитическое решение для случая, когда время релаксации температурного поля много меньше, чем время релаксации концентрационного. Найденные решения позволили подтвердить некоторые особенности процесса, обнаруженные ранее для случая классического массопереноса. Например, была обоснована гипотеза о самоподобных (фрактальных) свойствах двухфазной зоны. Аналитические решения проблемы позволили понять сложное влияние нелинейных эффектов массопереноса на процесс. Было выяснено, что рост коэффициента температурной зависимости диффузии может приводить как к увеличению протяженности зоны, так и к ее уменьшению, в зависимости от значений температурных градиентов в разных фазах. Действие же эффекта Соре зависит от знака коэффициента термодиффузии (при отрицательном значении коэффициента, термодиффузионный поток вещества усиливает переохлаждение перед кристаллом, при положительном — уменьшает). Кроме того, было показано, что рассматриваемые нелинейные эффекты способны изменять температурные и концентрационные профили в системе, долю твердой фазы в двухфазной зоне, скорость затвердевания, протяженность переохлажденной области и другие характеристики процесса по сравнению с классическим случаем массообмена. Определены скачки теплофизических величин при переходе через переохлажденную область, а также сформулирована фронтальная модель затвердевания с двухфазной зоной.

- Впервые аналитически исследовано влияние слабой конвекции на кристаллизацию бинарного расплава. Выписана модель направленного затвердевания с одномерным потоком расплавленного вещества, натекающим на растущий слиток. Получено ее точное решение и найдены выражения для всех параметров, описывающих процесс: распределение температуры и концентрации примеси по различным фазам, доли твердых кристаллов в двухфазной зоне, протяженности зоны и скорости движения ее границ. С помощью полученных аналитических решений было исследовано влияние конвекции на эволюцию процесса. Например, было выяснено, что слабая конвекция практически не оказывает влияния на распределение концентрации примеси в двухфазной зоне, однако она способствует выравниванию температурного и концентрационного профилей в расплаве к постоянным значениям. Показано, что при увеличении скорости потока, наплывающего на кристалл, скорость затвердевания также возрастает. Определены рамки применимости рассматриваемой одномерной конвективной модели – низкие скорости движения расплава (что вполне согласуется с физическими представлениями о процессе) и выведены условия, при которых построенные аналитические решения разрушаются. Кроме того, был сделан вывод о том, что решения, полученные ранее для случая неподвижной жидкой фазы, неустойчивы по отношению к малым скоростям течения расплава.
- Впервые проведено полное исследование процесса направленного затвердевания с неравновесной двухфазной зоной, в которой переохлаждение существенно и не считается близким к нулю. Построена квазистационарная модель процесса кристаллизации, которая включает в себя кинетические механизмы, отвечающие за появление и рост кристаллов в области концентрационного переохлаждения. Впервые получено приближенное аналитическое решение проблемы. Выписаны выражения для функций, задающих плотность распределения кристаллов по размерам и их объемной доли в двухфазном слое, вычислены радиусы наибольших частиц в зоне и определено общее число кристаллов в системе. Найденные аналитические решения позволили описать макроскопическое строение двухфазной зоны: удалось выделить три региона с принципиально разным поведением концентрационного переохлаждения. В слое, прилегающем к расплаву, рост твердых кристаллов практически не происходит, их объемная доля близка к нулю и они слабо влияют на процесс. Поэтому в этом регионе переохлаждение растет по линейному закону. При достижении максимума концентрационного переохлаждения элементы твердой фазы начинают интенсивно расти и выделяемая ими скрытая

теплота кристаллизации постепенно снимает переохлаждение (в этой области переохлаждение убывает), в результате чего, в прилегающем к кристаллу третьем регионе двухфазной зоны концентрационное переохлаждение близко к нулю и процесс протекает в квазиравновесном режиме. Исследованы рамки применимости рассматриваемой модели. Указано на невозможность применения используемой кинетической теории роста частиц для описания всей двухфазной зоны (теория не работает при больших значениях объемной доли твердой фазы), а также даны некоторые рекомендации, позволяющие адаптировать рассматриваемую модель для описания всей зоны.

В заключении можно сказать, что исследования, проведенные в диссертации, позволили определить ряд новых нелинейных свойств двухфазной зоны, которые ранее невозможно было понять, используя классическую квазиравновесную модель В.Т. Борисова. Кроме того, упор, сделанный на теоретическое исследование проблем, позволил построить три новых, ранее неизвестных, аналитических решения задачи о направленной кристаллизации с двухфазной зоной, что само по себе представляет значительное достижение.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

1. Асеев Д.Л., Александров Д.В. *Нелинейная динамика затвердевания бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной.* // ДАН – 2006. – Том **408** №5. – С. 609–613.
2. Александров Д.В., Асеев Д.Л. *Влияние термодиффузии на морфологическую устойчивость процесса автомодельного затвердевания с плоским фронтом.* // Расплавы – 2005. – №2. – С. 50–62.
3. Aseev D.L., Alexandrov D.V. *Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection.* // Acta Materialia – 2006. – Vol. **54**. – P. 2401–2406.
4. Alexandrov D.V., Aseev D.L. *Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity.* // Computational Materials Science – 2006. – Vol. **37**. – P. 1–6.
5. Alexandrov D.V., Aseev D.L. *One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity.* // J. Fluid Mech. – 2005. – Vol. **527**. – P. 57–66.
6. Асеев Д.Л. *Структура двухфазной зоны концентрационного переохлаждения в затвердевающем расплаве.* // Сборник научных трудов

- 3-й научно-технической конференции “Физические свойства металлов и сплавов”. Екатеринбург, 2005. – С. 133–137.
7. Александров Д.В., Асеев Д.Л. *Автомодельное затвердевание: морфологическая устойчивость при температурно-зависимой диффузии.* // Труды XI российской конференции “Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов”. – Екатеринбург: ЮУрГУ, 2004. – Том 4. – С. 32–36.
 8. Асеев Д.Л., Александров Д.В. *Аналитическое описание области концентрационного переохлаждения перед растущим кристаллом.* // Сборник материалов 10-й российской научно-студенческой конференции “Физика твердого тела”. Томск, 2006. – С. 13–16.
 9. Асеев Д.Л. *Структура переохлажденной области в затвердевающих расплавах.* // Демидовские чтения на Урале. Тезисы докладов. Екатеринбург, 2006. – С. 63–64.
 10. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П., Булычева С.В., Елфимов Ю.А., Кискачи А.В., Комаровский М.Е., Ширшов И.А. *Тепломассоперенос и его влияние на структурообразование твердой фазы в процессах кристаллизации расплавов.* // Региональный конкурс РФФИ “Урал”, Свердловская область. Результаты научных работ, полученные за 2004 г. Аннотационные отчеты. Екатеринбург, 2005. – С. 79–82.
 11. Асеев Д.Л., Александров Д.В. *Структура двухфазной зоны концентрационного переохлаждения в затвердевающем расплаве.* // Сборник тезисов докладов 3-й научно-технической конференции “Физические свойства металлов и сплавов”. Екатеринбург, 2005. – С. 93–94.
 12. Асеев Д.Л., Александров Д.В. *Рост твердой фазы при совместном протекании направленной и объемной кристаллизации бинарных систем.* // Тезисы докладов 14-й Всероссийской школы-конференции молодых ученых “Математическое моделирование в естественных науках”. Пермь, 2005. – С. 4–5.
 13. Асеев Д.Л. *Кристаллизация расплава в присутствии двухфазной зоны при условиях нелинейного тепломассопереноса.* // IX областной конкурс студенческих научно-исследовательских работ, Тезисы студенческих научных работ. Екатеринбург, 2005. – С. 16–18.
 14. Асеев Д.Л. *Влияние слабой конвекции на кристаллизацию расплава.* // Сборник тезисов Одиннадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых. Екатеринбург, 2005. – С. 546–547.

15. Alexandrov D.V., Aseev D.L. *Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity*. // Book of abstracts 14th international workshop on computational mechanics of materials. Goa, India, 2004. – P. 1–2.

Список литературы

- [1] Борисов В.Т. *Теория двухфазной зоны металлического слитка*. – М.: Металлургия, 1987. – 224 с.
- [2] Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. *Macrokinetics of cristallization*. – Begell House, New-York - Wallingford, 2001. – 184 p.
- [3] Van Vaerenbergh S., Coriell S.R., McFadden G.B. // J. Crystal Growth – 2001. – Vol. **223**. – P. 565–572.
- [4] Alexandrov D.V. // Acta Mater. – 2001. – Vol. **49**. – P. 759–764.
- [5] Czapelski M. // J. Crystal Growth – 1998. – Vol. **187**. – P. 138–139.
- [6] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Физическая кинетика*. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
- [7] Флемингс М. *Процессы затвердевания*. – М.: Мир, 1977. – 424 с.

Подписано в печать . Формат 60x84/16

Бумага офсетная. Усл. печ. л. .

Заказ № . Тираж 100.

Отпечатано в ИПЦ “Издательство УрГУ”.

г. Екатеринбург, ул. Тургенева, 4.